



Основная профессиональная образовательная программа
04.03.01 Химия
(Медицинская и фармацевтическая химия)

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации

ИВАНОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Кафедра фундаментальной и прикладной химии

ОДОБРЕНО:

Руководитель ОП

Л.Б. Кочетова
(подпись)

« 1 » сентября 20 21 г.

Рабочая программа дисциплины
Квантовая механика и квантовая химия

Уровень высшего образования:	бакалавриат
Квалификация выпускника:	бакалавр
Направление подготовки:	04.03.01 Химия
Направленность (профиль) образовательной программы:	Медицинская и фармацевтическая химия

Иваново



Основная профессиональная образовательная программа
04.03.01 Химия
(Медицинская и фармацевтическая химия)

1. Цели освоения дисциплины

Целями дисциплины «Квантовая механика и квантовая химия» являются:

- формирование представлений о современной теоретической химии;
- приобретение знаний, умений и навыков для исследования свойств молекул лекарственных соединений и биологически активных веществ, решения теоретических задач химии, а также для научно-исследовательской деятельности, связанной с изучением химических явлений и процессов, при разработке и исследовании лекарственных средств методами компьютерного моделирования, научно-производственной и педагогической деятельности.

2. Место дисциплины в структуре ОП

Дисциплина относится к обязательной части образовательной программы.

Требования к входным знаниям, умениям и компетенциям студента формируются на основе на результатах изучения дисциплин: «Математика», «Физика», «Общая и неорганическая химия», «Информатика и информационные технологии в химии».

Для освоения данной дисциплины обучающийся должен:

Знать:

- основные законы естественнонаучных дисциплин: математики (алгебра, геометрия, математический анализ, высшая математика), физики (классическая и волновая механика, атомная физика), общей химии.

Уметь:

- работать с компьютером на уровне пользователя;
- решать математические задачи;
- применять основные законы химии при обсуждении полученных результатов.

Иметь: практический опыт/Иметь навыки:

- первичные навыки решения математических и прикладных задач.

Успешное освоение данной дисциплины будет способствовать готовности студентов к освоению дисциплин "Компьютерное моделирование строения и свойств биологически активных веществ", "Физическая химия", "Органическая химия".

3. Планируемые результаты обучения по дисциплине

3.1. Компетенции, формированию которых способствует дисциплина

При освоении дисциплины формируются следующие компетенции в соответствии с ФГОС ВО по данному направлению подготовки:

а) общепрофессиональные (ОПК):

ОПК-3 Способен применять расчетно-теоретические методы для изучения свойств веществ и процессов с их участием с использованием современной вычислительной техники

ОПК-5 Способен понимать принципы работы современных информационных технологий и использовать их для решения задач профессиональной деятельности

3.2. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесенных с формируемыми компетенциями

В результате освоения дисциплины обучающийся должен:

Знать:

- основы квантовой механики и квантовой химии и истории ее возникновения, основные концепции и способы квантово-химических расчетов (ОПК-3, ОПК-5)

Уметь:

- работать с компьютером на уровне пользователя (ОПК-5)



Основная профессиональная образовательная программа
04.03.01 Химия
(Медицинская и фармацевтическая химия)

- использовать англоязычные версии программ для квантово-химических расчетов (ОПК-5)
- выполнять квантово-химические расчеты электронного строения простых молекул с помощью современных программ (ОПК-3)
- выполнять анализ результатов расчетов, включающий рассмотрение диаграмм МО, энергии ионизации молекулы, зарядов на атомах, дипольных моментов (ОПК-3)
- составлять отчеты и делать выводы и обобщения (ОПК-3)
- применять основные законы химии при обсуждении полученных математических расчетов и компьютерного моделирования (ОПК-5)
- применять методы математического анализа и моделирования для теоретического исследования (ОПК-3, ОПК-5)

Иметь:

- навыки работы с программой для квантово-химических расчетов и навыки выполнения анализа результатов расчета по выходному файлу, а также навыки сравнительного анализа вращательных, колебательных и электронных характеристик молекул (ОПК-3, ОПК-5).

4. Объем и содержание дисциплины

Объем дисциплины составляет 5 зачетных единиц, 180 академических часов.

4.1. Содержание дисциплины по разделам (темам), соотнесенное с видами и трудоемкостью занятий лекционно-семинарского типа

Объем иной контактной работы и самостоятельной работы обучающегося по дисциплине указан в учебном плане образовательной программы.

№ п/п	Разделы (темы) дисциплины	Семестр	Виды занятий, их объем		Формы текущего контроля успеваемости Формы промежуточной аттестации
			Занятия лекционного типа	Занятия семинарского типа	
1.	Описание состояния системы в квантовой механике. Задачи квантовой механики, соответствующие поступательному, вращательному и колебательному видам движения в молекулах.	4	12	20	Отчеты по лабораторным работам Коллоквиум
2.	Водородоподобные атомы. Многоэлектронные атомы. Приближенные методы решения квантово механических задач.	4	12	16	Отчеты по лабораторным работам Коллоквиум
3.	Теория химической связи. Молекула H_2^+ . Метод МО-ЛКАО. Многоэлектронные молекулы. Методы решения электронного волнового уравнения для многоэлектронных молекул.	4	12	16	Отчеты по лабораторным работам



Основная профессиональная образовательная программа
04.03.01 Химия
(Медицинская и фармацевтическая химия)

4.	Корреляционные диаграммы для гомо и гетеро ядерных двухатомных молекул. Определение свойств молекул с помощью метода МО.	4	12	20	Отчеты по лабораторным работам Коллоквиум
	Итого за семестр:		48	60	Экзамен

4.2. Развернутое описание содержания дисциплины по разделам (темам)

Содержание теоретической части

1. Краткие исторические сведения о возникновении квантовой теории. Волновые свойства микрочастиц. Волны де-Бройля. Соотношение неопределенностей Гейзенберга. Описание состояния системы в квантовой механике. Уравнение Шредингера. Волновая функция. Физический смысл квадрата волновой функции. Свойства волновых функций. Вырождение собственных функций. Средние значения физических величин.

2. Задачи квантовой механики, соответствующие поступательному, вращательному и колебательному видам движения в молекулах.

Частица в прямоугольной потенциальной яме. Оператор Гамильтона. Граничные условия и квантовые числа. Волновые функции. Уровни энергии, зависимость энергии от массы частицы и размера потенциальной ямы.

3. Жесткий ротатор. Оператор Гамильтона. Сферическая система координат. Граничные условия и квантовые числа. Волновые функции и их анализ, графики s , p и d функций. Уровни энергии, основное состояние жесткого ротатора. Вращательный спектр двухатомной молекулы.

4. Гармонический осциллятор. Оператор Гамильтона. Граничные условия и квантовые числа. Волновые функции и их анализ, графики функций. Уровни энергии и спектр гармонического осциллятора. Основное состояние. Принцип соответствия.

5. Водородоподобные атомы.

Оператор Гамильтона. Граничные условия и квантовые числа. Потенциальная и полная энергия электрона в атоме водорода. Уровни энергии и спектр водородоподобного атома. Вектор орбитального момента количества движения электрона. Проекция вектора МКД на ось внешнего поля. Волновые функции. Радиальные и угловые составляющие АО, их анализ, графики функций. Проникающие и непроникающие АО. Спин электрона. Полные волновые функции электрона. Атом во внешнем магнитном поле. Эффект Зеемана. Поведение атома в электрическом поле. Эффект Штарка.

6. Многоэлектронные атомы.

Приближенные методы решения квантово-механических задач.

Оператор кинетической и потенциальной энергий для многоэлектронного атома. Оператор Гамильтона. Метод Хартри. Одноэлектронное приближение. Эффективное поле для i -того электрона в атоме. Энергия АО. Основные и кулоновские интегралы. Полная энергия электронов в атоме.

Метод самосогласованного поля на примере двух электронного атома. Принцип Паули и определители Слетера. Запрет Паули. Требования, предъявляемые к волновым функциям многоэлектронных систем.

Метод Хартри-Фока. Основные, кулоновские и обменные интегралы. Полная энергия электронов в атоме, энергия АО в методе ХФ. Приближенные аналитические функции АО. Радиальные и



Основная профессиональная образовательная программа
04.03.01 Химия
(Медицинская и фармацевтическая химия)

угловые составляющие АО в многоэлектронных атомах. Атомные орбитали Слетера-Зинера. Гауссовы функции. Эффект экранирования электронов в многоэлектронном атоме. Константа экранирования. Эффективный заряд ядра. Правила для вычисления константы экранирования. Оценка размеров и энергий АО в многоэлектронных атомах.

Электронные конфигурации многоэлектронных атомов.. Электронные уровни, подуровни, АО и спин-АО. Периодическая система элементов и квантовая механика атомов. Потенциал ионизации, сродство к электрону, размеры атомов, валентные АО. Изменения свойств атомов вдоль рядов и периодов ПС.

7. Теория химической связи.

Одноэлектронная молекула H_2^+ . Уравнение Шредингера для молекул. Разделение электронного и ядерного движений. Принцип Борна-Оппенгеймера. Гамильтониан для молекулярного иона H_2^+ . Метод молекулярных орбиталей. Приближение МО-ЛКАО. Требования, предъявляемые к комбинируемым АО.

Расчет энергии и волновой функции иона H_2^+ . Кулоновский, обменный интегралы, интеграл перекрывания, их зависимость от расстояния между ядрами. Энергии и волновые функции основного и первого возбужденного состояния иона H_2^+ . Классификация МО двухатомных молекул. Связывающие, разрыхляющие и несвязывающие МО. Симметрия МО, σ -, π - и δ -МО.

Многоэлектронные молекулы. Методы решения электронного волнового уравнения для многоэлектронных молекул. Метод молекулярных орбиталей. Одноэлектронные спин-МО. Многоэлектронная волновая функция. Полная энергия электронов в молекуле. Вариационный принцип Ритца. Уравнения Рутаана. Вековое уравнение и вековой определитель. Схема процесса самосогласования в методе Хартри-Фока-Рутаана.

8. Корреляционные диаграммы для гомо- и гетероядерных двухатомных молекул. Определение свойств молекул с помощью метода МО.

Метод МО для многоэлектронных гомоядерных двухатомных молекул. Построение МО. Последовательность МО для молекул от Li_2 до Ne_2 .

Гетероядерные двухатомные молекулы. Молекулы HF, LiH, PF и др. Диаграммы МО. Распределение электронной плотности, заряды на атомах в молекуле, дипольный момент. Полярность химической связи. Различные типы диаграмм МО (s-s, s-p, p-p). Связь между коэффициентами при АО на МО и качественными предсказаниями о полярности химической связи. Достоинства метода МО по сравнению с методом ВС.

5. Образовательные технологии

При реализации дисциплины «Квантовая механика и квантовая химия» используются:

- рейтинговая технология;
- технологии смешанного обучения (лекции: проводятся в оборудованном компьютером и проектором классе в классическом варианте и в виде лекций-презентаций в Microsoft Office PowerPoint).

Лабораторные занятия: активно-деятельный подход к обучению студентов по дисциплине «Квантовая механика и квантовая химия» реализуется в индивидуальном выполнении заданий, по тематике совпадающей с материалом лекций. Все задания выполняются с использованием РС. Отчеты сдаются студентами как в электронном, так и в письменном виде.

6. Учебно-методическое обеспечение самостоятельной работы обучающихся

При самостоятельной работе (СРС) обучающимся предлагается использовать материалы лекций, литературу из доступных электронно-библиотечных систем и различных электронных ресурсов. Текущая и опережающая СРС, направленная на углубление и закрепление знаний, а также развитие практических умений заключается в:



Основная профессиональная образовательная программа
04.03.01 Химия
(Медицинская и фармацевтическая химия)

- работе обучающихся с лекционным материалом, поиск и анализ литературы и электронных источников информации по заданной проблеме;
- подготовке отчетов к лабораторным работам в соответствии с требованиями,
- подготовке к коллоквиумам и текущему и итоговому контролю;
- подготовке к экзамену.

Методический материал по обеспечению самостоятельной работы студентов приводится в приложении 1 к РП.

7. Характеристика оценочных средств для текущего контроля успеваемости и промежуточной аттестации обучающихся по дисциплине

В качестве оценочных средств для проведения текущего контроля выступают: Требования к представлению отчетов по практическим работам. Вопросы к коллоквиумам. Вопросы и практические задания к экзамену.

Типовые варианты вопросов и заданий находятся в приложении к РП в разделе «Фонд оценочных средств».

В качестве промежуточного контроля используется традиционная система экзамена по билету при устно-письменном индивидуальном опросе.

В содержание экзаменационного билета входит один теоретический вопрос и одно практическое задание, из доступного для студентов списка " Вопросы и практические задания к экзамену".

Критерии и шкала оценки:

- оценка «отлично» выставляется студенту, если полностью раскрыто содержание вопросов билета;
- оценка «хорошо» выставляется студенту, если один из вопросов раскрыт частично;
- оценка «удовлетворительно» выставляется студенту, если дан полный ответ только на один из предложенных вопросов или имеются существенные неточности в ответах на оба вопроса;
- оценка «неудовлетворительно» выставляется студенту, если ответы на вопросы отсутствуют или если даны ошибочные ответы на каждый вопрос.

Оценка за экзамен выставляется при наличии всех отчетов по лабораторным работам. Для пересчета набранных в течении семестра рейтинговых баллов (включая баллы за практические работы, коллоквиумы и ответы на экзамене) в обычные оценки используется шкала:

от 55 до 69 – «удовлетворительно»;

от 70 до 84 – «хорошо»;

от 85 до 100 – «отлично».

8. Учебно-методическое и информационное обеспечение дисциплины

А) Основная литература:

1. Ведринский Р.В. Квантовая механика [Электронный ресурс] : учебник / Ведринский Р.В. – Ростов н/Д: ЮФУ, 2009 – 384 с. Режим доступа:
<http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=240937>
2. Ефремов Ю.С. Квантовая механика [Электронный ресурс] : учебное пособие / Ефремов Ю.С. – М.-Берлин: Директ-Медиа, 2015. – 457 с. Режим доступа:
<http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=273446>
3. Крашенинин В.И. Квантовая химия и квантовая механика в применении к задачам [Электронный ресурс] : учебное пособие / Крашенинин В.И. , Газенаур Е.Г. , Кузьмина Л.В. – Кемерово: Кемеровский государственный университет, 2012. – 56 с. Режим доступа:
<http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=232678>



Основная профессиональная образовательная программа
04.03.01 Химия
(Медицинская и фармацевтическая химия)

Дополнительная литература:

1. Магазинников, А.Л. Введение в квантовую механику: учебное пособие / А.Л. Магазинников, В.А. Мухачёв. - Томск: Эль Контент, 2010. - 112 с.: ил.,табл., схем. - ISBN 978-5-4332-0046-3; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=208685>
2. Карлов, Н.В. Начальные главы квантовой механики / Н.В. Карлов, Н.А. Кириченко. - Москва: Физматлит, 2006. - 360 с. - ISBN 5-9221-0538-8; То же [Электронный ресурс]. - URL: <http://biblioclub.ru/index.php?page=book&id=68397>

Б) программное обеспечение и Интернет-ресурсы

Система электронной поддержки образовательного процесса «Мой университет»
<https://uni.ivanovo.ac.ru>

Профессиональные базы данных и информационно-справочные системы:

ЭБС «Университетская библиотека онлайн» www.biblioclub.ru

Электронная библиотека ИвГУ <http://lib.ivanovo.ac.ru>

Электронный каталог НБ ИвГУ <http://lib.ivanovo.ac.ru/index.php/ek>

Программное обеспечение: операционная система Microsoft Windows, пакет офисных программ Microsoft Office (Libre Office), интернет-браузер Internet Explorer, Мой университет.

- Программа Origin для построения графиков функций и выполнения МНК-анализа.

- Программа для расчета геометрических и электронных характеристик молекул HyperChem.

9. Материально-техническое обеспечение дисциплины

Учебные аудитории:

- для проведения занятий лекционного типа с комплектом специализированной учебной мебели и техническими средствами обучения, служащими для предоставления учебной информации большой аудитории;

- для проведения занятий семинарского типа, консультаций, текущего контроля и промежуточной аттестации с комплектом специализированной учебной мебели и техническими средствами обучения;

Помещение для самостоятельной работы, оснащенное комплектом специализированной учебной мебели, компьютерной техникой с возможностью подключения к сети «Интернет» и обеспечением доступа в ЭИОС.

Демонстрационное оборудование и учебно-наглядные пособия для занятий лекционного типа, обеспечивающие тематические иллюстрации: демонстрационное оборудование (модели, макеты), электронные пособия (презентации).



Основная профессиональная образовательная программа

04.03.01 Химия

(Медицинская и фармацевтическая химия)

Автор рабочей программы дисциплины: д.х.н., профессор кафедры фундаментальной и прикладной химии Гиричева Н.И., к.х.н., доцент кафедры фундаментальной и прикладной химии Волкова Т.Г.

Программа рассмотрена и утверждена на заседании кафедры фундаментальной и прикладной химии « 31 » августа 2021 г., протокол № 1

Программа обновлена
протокол заседания кафедры № _____ от « _____ » _____ 20__ г.

Согласовано:

Руководитель ОП _____ Л.Б. Кочетова
(подпись)

Программа обновлена
протокол заседания кафедры № _____ от « _____ » _____ 20__ г.

Согласовано:

Руководитель ОП _____
(подпись)

Программа обновлена
протокол заседания кафедры № _____ от « _____ » _____ 20__ г.

Согласовано:

Руководитель ОП _____
(подпись)